第32卷，第12期
2012年12月

光谱学与光谱分析
Spectroscopy and Spectral Analysis

Vol. 32, No. 12, pp3406-3410
December, 2012

轻小型中阶梯光栅光谱仪光学设计及性能分析

宁春丽[1,2]，齐向东[1]，陈少杰[1,2]，巴音贺希格[1]，崔继承[1,2]

1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所，吉林 长春 130033
2. 中国科学院研究生院，北京 100049

摘 要 中阶梯光栅光谱仪采用中阶梯光栅与棱镜交叉色散结构，在像面形成二维光谱。影响中阶梯光栅光谱仪分辨率因素较多。分析了针孔直径、光栅参数、棱镜参数、CCD像素尺寸和像差对系统分辨率的影响，得到针孔、光栅、CCD是影响系统分辨率的主要因素，并推导三者在确定系统实际分辨率时相互制约的关系，从而设计一种高分辨率轻小型中阶梯光栅光谱仪。结果表明，轻小型中阶梯光栅光谱仪像差得到充分校正，分辨率达到设计要求。通过对拍摄的汞灯谱图进行还原与标定，实际分辨率为0.038 nm，达到目标值(0.05@200 nm)的要求。而普通的光栅光谱仪要达到这样的分辨率，其焦距是500 mm左右，充分体现轻小型的优势。

关键词 中阶梯光栅；光学设计；光谱分辨率；CCD；棱镜

中图分类号：TH744.1 **文献标识码**：A **DOI**：10.3964/j.issn.1000-0593(2012)12-3406-05

引 言

中阶梯光栅光谱仪是一种高分辨率光谱仪器，由中阶梯光栅和棱镜组成交叉色散结构，在像面上形成二维光谱，采用面阵CCD接收。它克服了传统扫描式光栅光谱仪获得谱图过程繁琐、测试时间长的缺点，具有动态范围大、无移动部件、结构紧凑、可实现多元素光谱的瞬态直读测量以及背景校正、波长自动标定等多种功能。作为一种通用光谱仪器，20世纪70年代中阶梯光栅光谱仪开始在天文领域率先得到应用，德国的“Venus Express”宇宙飞船、日本的先进地球探测卫星ADEO-2上，均搭载中阶梯光栅光谱仪进行大气中微量物质的探测。近年来，它已从最初的天文观测逐渐走向民用领域，在生命科学、环境保护、石油化工、钢铁冶金、食品卫生、商品检验等多个领域都有广泛的应用。目前，国内外热衷于中阶梯光栅光谱仪的研制，主要着眼于其高分辨率的特性，但与此同时也带来了体积大、不易携带等的缺点。因此，随着现代科学技术的不断进步，尤其是二维阵列探测器技术的发展，使得小型化、轻量化、便携式和高分辨率逐渐成为光谱仪器的发展方向之一。小型中阶梯光栅光谱仪显示了它独特的优越性，不仅囊括中阶梯光栅光谱仪的所有优点，而且还具有现场应用价值以及二次开发性能。此外，还可以利用它进一步制造其他分析仪器，例如：激光诱导等离子体原子发射光谱仪、电感耦合等离子体原子发射光谱仪等[1-3]。

仪器的分辨率、光谱响应范围以及响应灵敏度等参数决定了光谱仪的性能，分辨率是光栅光谱仪最重要的性能参数之一。影响中阶梯光栅光谱仪光谱分辨率的因素主要包括系统有效焦距、针孔直径、光栅及棱镜分辨率、CCD探测器的分辨率、镜子面型、系统像差等。其中，有效焦距根据系统要求是固定不可调的，而其他参数则可以根据实际情况予以设定或调整。

1 工作原理及影响光谱分辨率的因素

1.1 工作原理

轻小型中阶梯光栅光谱仪的光学系统结构如图1所示，它由针孔、准直镜、中阶梯光栅、反射棱镜、聚焦镜、柱面镜和面阵CCD组成，光学系统采用Czerney-Turner(C-T)结构形式[4,5]。与传统的光栅光谱仪光学结构相比中阶梯光栅光谱仪采用了交叉色散形式，即在主色散元件中阶梯光栅分光的基础上又配以辅助色散元件棱镜进行横向色散，解决由于中阶梯光栅使用高级次而造成的衍射级次彼此重叠的问题；采用面阵CCD接收交叉色散后形成的二维光谱，再将二维光谱还原为一维光谱信息，可以实现波长的精确标定，大大的提高了系统的光谱分辨率[6-8]。

收稿日期：2012-04-25，**修订日期**：2012-07-15

基金项目：国家自然科学基金项目(61108032)，国家重大科学仪器设备开发专项(2011YQ120023)资助

作者简介：宁春丽，女，1987年生，中国科学院长春光学精密机械与物理研究所硕士研究生 e-mail：ningchunli.hi@163.com

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

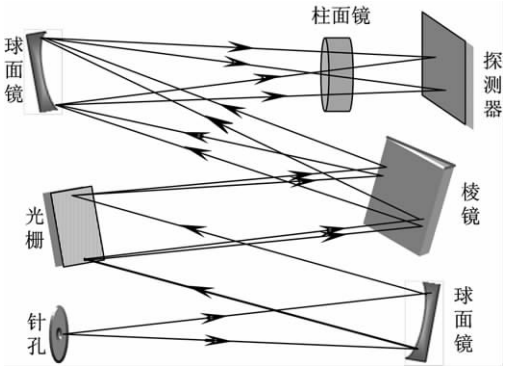

Fig. 1　Scheme of echelle spectrograph

1.2　影响光谱分辨率的主要因素

1.2.1　中阶梯光栅

作为核心色散元件，中阶梯光栅实质上是一种特殊的衍射光栅，刻线数较少，刻槽剖面形状是宽而深的直角。因入射光线和衍射光线不在主截面内，须考虑锥面衍射，根据矢量衍射理论可推导出光栅方程为[9]

$$d(\sin\alpha+\sin\beta)\cos\delta = m\lambda \tag{1}$$

其中，α 为入射角，β 为衍射角，d 为光栅周期，δ 为光栅偏转角。中阶梯光栅的入射角、衍射角和闪耀角都比较大，从而可以工作在较高的衍射级次，一般工作级次为几十级到上百级，对应的自由光谱范围($\Delta\lambda=\lambda/m$)很小。在准 Littrow 条件下其分辨本领可简化为

$$R_G = mK = m\frac{W}{d} = \frac{2W}{\lambda}\sin\theta_B\cos\delta \tag{2}$$

式中，K 为光栅刻线总数，W 是光栅面的有效宽度。对于给定的波长，分辨率取决于光栅宽度和衍射角。本仪器选用的中阶梯光栅周期 d 为 1/54.49 mm，闪耀角 θ_B 为 46°，刻划面尺寸 16 mm×16 mm，对应光谱级次 78～146 级，覆盖的光谱范围 180～300 nm。

1.2.2　棱镜

棱镜作为辅助色散元件将经过中阶梯光栅后的重叠光谱级次在垂直主色散方向上分开，从而在像面上形成二维光谱。设波长为 λ 的光波以角度 i_1 入射到棱镜前表面(如图 2)，折射光线经棱镜后表面反射，在前表面二次折射后出射

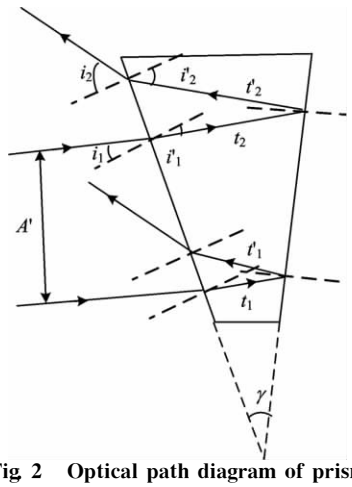

Fig. 2　Optical path diagram of prism

角为 i_2，两次折射角分别为 i'_1 和 i'_2，棱镜顶角为 γ，φ 为出射光线与入射光线的夹角(i_2-i_1)。

根据折射定律及角度换算可以求得

$$\sin i_1 = n\sin\left[2\gamma-\arcsin\left(\frac{\sin i_2}{n}\right)\right] \tag{3}$$

棱镜的理论分辨率为有效孔径宽度和角色散率之积[10]

$$R_L = A'\frac{d\varphi}{d\lambda} = A'\frac{d\varphi}{dn}\frac{dn}{d\lambda} = 2t\frac{dn}{d\lambda} \tag{4}$$

其中 A' 为棱镜的入射有效孔径宽度，t 为通过棱镜子午面(两次通过棱镜子午面)的上下边缘入射光线的几何长度差 $(t'_2-t'_1)+(t_2-t_1)$。根据系统设计要求，综合考虑系统波段范围、横向色散分辨率以及系统像面尺寸的限制，选用熔石英作为棱镜材料，其入射角 i_1 为 21°，顶角 γ 为 20°。

1.2.3　针孔

针孔位于系统的物方焦平面，所以针孔大小与光谱仪的实际分辨本领有直接关系。将上述中阶梯光栅光谱仪光学结构转化为简单的 C-T 结构，准直镜和聚焦镜焦距相等($f_1=f_2=f$)。为了分析针孔直径对测量谱线的影响，设入射光束中心波长 λ，照射到光栅上的入射角 α、衍射角 β。当针孔直径为 S 时(针孔位于球面镜焦平面上)，针孔上每一点都可看作发光点，入射到光栅的光束具有一定角宽度 $\Delta\alpha$($\Delta\alpha=S/f$)。式(1)两边对 α 与 λ 求微分并将角宽度 $\Delta\alpha$ 代入，得到针孔直径 S 在主色散方向上引起的光谱增宽 $\Delta\lambda_{S//}$

$$\Delta\lambda_{S//} = \frac{Sd}{fm}\cos\alpha\cos\delta \tag{5}$$

经光栅衍射后，光线进入交叉色散棱镜内，由针孔直径 S 引起的角宽度同样会导致棱镜入射光产生一定角宽度变化($\Delta\beta=\Delta i_1$)，从而影响了棱镜的分光。式(3)两边分别对棱镜入射角 i_1 及 λ 求微分并将 Δi_1 代入可得针孔直径 S 在横向色散方向引起的光谱增宽 $\Delta\lambda_{S\perp}$

$$\Delta\lambda_{S\perp} = \frac{\cos i_1\cos i_2}{\sin 2\gamma\frac{dn}{d\lambda}}\frac{\cos\alpha}{\cos\beta}\frac{S}{f} \tag{6}$$

由式(5)与式(6)可以确定针孔直径与光谱增宽成正比，因此在选择针孔直径时应尽量的小。

1.2.4　探测器

由于中阶梯光栅光谱仪在像面呈现二维光谱，光谱信息复杂，为了获得高质量的光谱图像，必须根据光学系统要求，选择最佳匹配的面阵 CCD。CCD 对光谱强度轮廓的采样过程应符合采样定理[11-13]，其光谱分辨率由系统的线色散率和像元大小确定，设 CCD 的最小可分辨波长差为 $\Delta\lambda_C$，系统的线色散率为 $dl/d\lambda$，像元大小为 p，则

$$R_C = \frac{\lambda}{\Delta\lambda_C} = \frac{\lambda}{2p}\frac{dl}{d\lambda} = \frac{\lambda}{2p}\frac{mf}{d\cos\delta\cos\beta} \tag{7}$$

探测器 CCD 的光谱分辨率与像元的大小成反比，即像元数越多、像元尺寸越小，系统的分辨率越高。综合探测器各项性能参数以及光学系统的要求进行考虑，选用像元大小 p 为 13 μm，像元数为 1 024×1 024，180～300 nm 光谱范围内量子效率较高，美国 Princeton 公司生产的 1024BUV 型 CCD。

1.2.5　像差

中阶梯光栅光谱仪光学系统采用 C-T 结构形式，针孔和

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

探测器、准直镜和聚焦镜分别置于一对交叉的对角线两端。根据 Cary 原理[14]，控制离轴角(入射光线与出射光线在垂直光栅法线面方向夹角 ε)，以有效平衡各种像差。ε 除了和准直镜、聚焦镜的离轴角有关外，还与光栅的位置有关，可以通过合理设计两块球面反射镜的离轴角(ε_1 和 ε_2)及光栅的偏转角 δ，使光学系统获得一个最佳离轴角，既能保证光栅出射的衍射光线不返回到光栅上，又有利于光路安排，同时还大大的减小了系统的彗差。

像散的存在主要由于球面反射镜在子午方向(τ)和弧矢方向(s)的焦距不同，子午和弧矢方向的焦距可分别表示为

$$f_{\tau i} = \frac{r_{\tau i}}{2}\cos\varepsilon_i, \quad f_{si} = \frac{r_{si}}{2\cos\varepsilon_i} \tag{8}$$

其中，r 为曲率半径，$i=1$，2 分别表示准直镜和聚焦镜。$r_{\tau i}$ 与 r_{si} 相等时子午面焦距明显比弧矢面焦距小，导致弧矢面产生扩展焦距 Δf。用一个柱面镜来校正像散，它恰能在子午方向和弧矢方向产生不同的补偿焦距即($f_\tau > f_s$)，使 Δf 大大的减小。

用离轴抛物镜代替球面镜不但可以消除球差、减小像散，还可以通过选择合理的曲率半径来降低彗差对系统分辨率的影响，但是非球面镜加工困难且成本较高。在使用球面镜也能满足系统分辨率要求的情况下，选用球面镜作为光学系统的准直镜和聚焦镜。通过控制准直镜、聚焦镜和光栅的参数来校正彗差和像散，得到基本的光学结构参数：$\varepsilon_1=5°$，$\varepsilon_2=8.17°$，$\delta=3°$，$\varepsilon=7°$及柱面镜弧矢半径 $R_S=150$ mm。

2 设计结果及实验数据分析

2.1 光学设计结果

根据上述分析，在系统焦距确定情况下(100 mm)，以获得光学系统的最佳分辨率为目标，选择和确定了各个光学元件的参数，从而设计了一种轻小型中阶梯光栅光谱仪，总体光学设计方案如图 3 所示。其色散系统采用中阶梯光栅与交叉色散棱镜相配合，将重叠的光谱级次分开，在像面上形成二维光谱图。探测器前引入柱面镜减小经色散系统后成像在弧矢面的像散，极大的降低了光学系统像差。探测器为 1 024×1 024 CCD，像元大小 13 μm×13 μm 时，一次曝光可记录下 180～300 nm 的光谱。对轻小型中阶梯光栅光谱仪光学系统进行了光线追迹，并通过点列图充分展示了各波段的像差及分辨率情况，CCD 靶面上的光学成像质量如图 4 所示。通过前面的分析可知中阶梯光栅光谱仪的分辨率主要由色散元件、针孔、CCD 像素和像差等因素决定。此外还受镜子的面型以及衍射限的影响，但由于其对分辨率影响较小没有具体

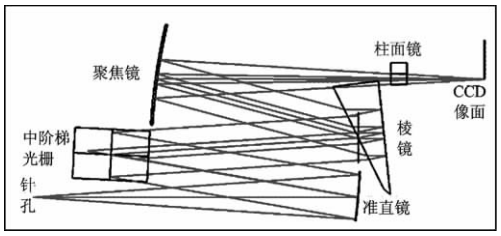

Fig. 3 Optical design of portable echelle spectrograph

讨论。通过合理的光学设计，平衡各元件的限制条件，使系统分辨率达到最佳状态，表 1 给出了不计像差由各个光学元件在理想状况下最小可分辨波长。

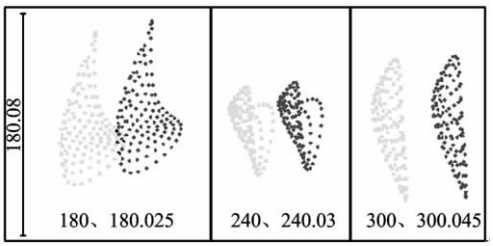

Fig. 4 Image quality of portable echelle spectrograph (wavelength units: nm)

Table 1 Minimum resolvable wavelengths of various optical components in ideal case (nm)

级次	中心波长	光栅	棱镜	针孔		CCD
				色散方向	垂直色散方向	
87	301.216 48	0.003 97	0.067 69	0.036 37	2.381 18	0.037 81
109	240.420 50	0.002 53	0.023 80	0.029 02	1.050 07	0.030 18
146	179.492 01	0.001 41	0.004 96	0.021 66	0.293 68	0.022 53

通过图 4 与表 1 的对比可知中心波长和边缘波长(即整个工作波段)的像差均得到较好的校正，虽然有部分像差的存在但仍能满足系统分辨率要求。棱镜和针孔垂直色散方向对最小分辨波长的贡献并没有影响光学系统分辨率，表明棱镜只影响横向色散方向光谱级次分开的程度，即影响光谱级次分开的均匀性。因此，光栅、针孔和 CCD 成为影响系统分辨率的三大主要因素。

2.2 数据分析

下面分析针孔、光栅、CCD 对系统最小分辨波长 $\Delta\lambda$ 的影响，假设 $\Delta\lambda=\Delta\lambda_{S//}>\Delta\lambda_G$ 与 $\Delta\lambda_C$，即针孔所确定的最小可分辨波长比光栅和 CCD 能够分辨的最小波长都大，那么系统实际分辨本领由针孔的分辨本领决定；$\Delta\lambda=\Delta\lambda_C>\Delta\lambda_{S//}$ 与 $\Delta\lambda_G$，即 CCD 不能分辨 $\Delta\lambda$ 的两个波长的光谱信息，此时系统分辨率由 CCD 的分辨本领决定；$\Delta\lambda=\Delta\lambda_G>\Delta\lambda_{S//}$ 与 $\Delta\lambda_C$，根据瑞利判据光栅无法分辨波长差为 $\Delta\lambda$ 的两个波长，这时系统总的分辨率由光栅来确定。本实验(由表 1 可以看出)，光栅的参数决定了系统分辨率上限，下限由 CCD 像元尺寸确定。在 CCD 参数已经选定的情况下，由式(5)和式(7)得到针孔的极限直径公式

$$S = 2r\frac{\cos\beta}{\cos\alpha} \quad (\Delta\lambda_{S//} = \Delta\lambda_C > \Delta\lambda_G) \tag{9}$$

计算得到系统的极限针孔直径为 26 μm，即在此基础上继续减小针孔直径系统的分辨率也不会提高，因此实验中选用的针孔直径为 25 μm。

实验中以汞灯作为光源，由于汞灯特征谱线能量差异以及受探测器动态范围的限制，分别在不同积分时间条件下拍摄汞灯二维光谱图像，如图 5 所示。经过谱图还原与波长的精确标定，得到汞灯两个特征波长 184.152 和 253.652 nm 的光斑位置及对应所占的像素数。根据 CCD 采样定理，像面

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

上的光谱点至少占 2 个像元系统才能分辨相邻的最小波长，但在实际的光学系统中由于像差及装调误差等原因使得光斑产生不同程度的弥散，我们将光斑能量半宽度所对应的像元数作为光斑点所占像元数来计算系统的实际分辨率。由图 5

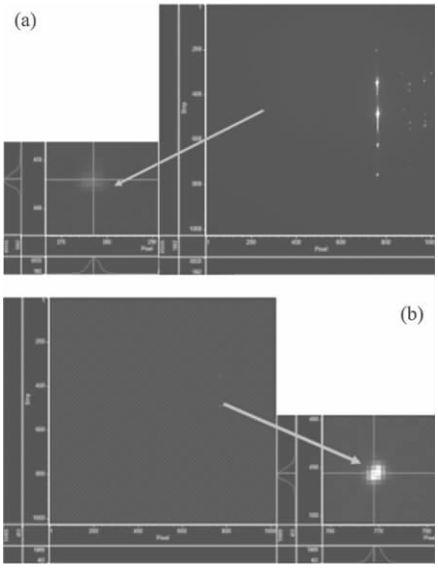

Fig. 5　Image quality of Hg lamp wavelength with different integration time

(a)：184.152 nm (180 s)；(b)：253.652 nm (180 ms)

可知，所测光斑清晰且能量较集中，半宽度对应的像元数均为 3，实际分辨率 $\Delta\lambda$ 分别为 0.035@184.152 nm 和 0.048@253.652 nm，由此可知系统在 180～300 nm 波段范围内，像差得到充分的校正，实际分辨率满足系统要求。仪器外形尺寸为 110 mm×80 mm×50 mm，总重量约 0.5 kg(相机除外)。

3　结　论

随着对光谱仪器研究的日益活跃，中阶梯光栅光谱仪以其小型化与高分辨率并存的优势在光谱仪器行业十分引人注目。系统分辨率是评价光谱仪器的主要性能指标之一，因此研究影响其光谱分辨率的各种因素对光学设计具有十分重要的意义。通过对光学模块的各元件以及像差等因素的理论分析，设计了一种轻小型中阶梯光栅光谱仪的光学系统，并通过实验对比分析知：(1)交叉色散的棱镜只是将重叠的光谱级次分开，对系统最终分辨率没有明显的影响。(2)针孔、中阶梯光栅、CCD 探测器是影响系统分辨率的主要因素且三者相互制约，系统的极限分辨率由光栅决定，但实际分辨率则受限于 CCD 像元的大小(极限针孔条件下)。(3)根据所选择的中阶梯光栅和探测器的不同可计算出对应光学系统的最小针孔直径，继续减小针孔直径也无益于分辨率的提高，通过计算可得最小针孔直径是 26 μm。选用像元大小为 13 μm 的 CCD，对应的系统的实际分辨率为 0.038@200 nm，是同体积一般光栅光谱仪分辨率的几倍甚至十几倍。

References

[1] Harrion G R, Archer J E, Camus J. Opt. Soc. Am., 1952, 42 (10): 706.
[2] Zhu Y, Xu W. Optical and IR Telescope Instrumentation and Detectors. Washington, USA: SPIE, 2000. 141.
[3] Tousey R, Purcell J D, Garrett D L. Applied Opitcs, 1967, 6(3), 365.
[4] TANG Yu-guo, SONG Nan, Bayanheshig, et al(唐玉国，宋　楠，巴音贺希格，等). Opt. Precision Eng.(光学精密工程), 2010, 18 (9): 1989.
[5] XUE Qing-sheng, WANG Shu-rong, LU Feng-qin(薛庆生，王淑荣，鲁凤芹). Acta Optica Sinica(光学学报), 2009, 29(1): 35.
[6] TANG Yu-guo, CHEN Shao-jie, Bayanheshig, et al(唐玉国，陈少杰，巴音贺希格，等). Opt. Prcision Eng.(光学精密工程), 2010, 18 (10): 2130.
[7] HE Miao, TANG Yu-guo, CHEN Shao-jie(何　淼，唐玉国，陈少杰). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2012, 32(3): 849.
[8] QI Xiang-dong, HAN Peng-peng, PAN Ming-zhong, et al(齐向东，撖芃芃，潘明忠，等). Opt. Precision Eng.(光学精密工程), 2011, 19(12): 2870.
[9] Bayanheshig, QI Xiang-dong, TANG Yu-guo(巴音贺希格，齐向东，唐玉国). Acta Physica Sinica(物理学报), 2003, 52(5): 1157.
[10] WU Guo-an(吴国安). Spectral Instrument Design(光谱仪器设计). Beijing: Science Press(北京：科学出版社), 1978. 70.
[11] YANG Xiao-dong, LI Zheng-deng(杨晓冬，李正灯). Journal of Jiaying University(嘉应学院学报), 2008, 26(6): 38.
[12] TANG Yi, CHEN Hai-qing, ZHANG Zi-ye(唐　奕，陈海清，张子业). J. Huazhong Univ. of Sci. & Tech.(华中科技大学学报), 2002, 30(10): 96.
[13] ZHANG Yan, FANG Li-guang(张　燕，方利广). Jiangxi Science(江西科学), 2005, 23(5): 605.
[14] Murtymvrk. Applied Optic, 1973, 12(9): 2018.

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

Optical Design and Performance Analysis of Light and Small Echelle Spectrograph

NING Chun-li[1,2], QI Xiang-dong[1], CHEN Shao-jie[1,2], Bayanheshig[1], CUI Ji-cheng[1,2]
1. Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033, China
2. Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract The present paper analyzed the influence of the pinhole diameter, grating parameters, CCD pixel size, prism parameters, system aberrations and found that the first three are the main factors, and then deduced the mutual restraint relationship among them. On this basis, a portable high-resolution echelle spectrograph was designed. Applying this design, aberration was fully corrected and spectral resolution achieved the demand. With the Hg lamp calibrated and restored, the actual resolution gets up to 0.038 nm which is significantly better than target (0.05@200 nm), while the ordinary grating spectrometers need 500 mm focal length to achieve this resolution. From this result, the advantages of the portable echelle spectrograph are fully demonstrated.

Keywords Echelle grating; Optical design; Spectral resolution; CCD; Prism

(Received Apr. 25, 2012; accepted Jul. 15, 2012)

© 1994-2013 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net